

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000231

Державний реєстраційний номер: 0119U100025

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Ln-вмісні поліоксометалати з лакунарними ізополіаніонами та ортованадати зі структурою циркону

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, буд. 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 758.603
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Полюксометалати, ортованадати та оксіортосилікати перехідних металів і лантанідів для створення новітніх матеріалів

Назва роботи англійською:

Polyoxometalates, orthovanadates and oxyorthosilicates of transition metals and lanthanides for creation of new materials

Реферат українською:

Досліджено утворення Ho(III)-вмісних поліоксовольфраматів у підкислених до різної кислотності $Z = \frac{\alpha(\text{H}^+)}{\alpha(\text{WO}_4^{2-})} = 0.80, 1.17, 1.29$ та 1.50 розчинах системи $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{HNO}_3 - \text{Ho}(\text{NO}_3)_3 - \text{H}_2\text{O}$. Встановлено умови синтезу $\text{Na}_9[\text{Ho}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 23\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}_2\text{Ho}_2[\text{Ho}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 46\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ho}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]_3 \cdot 54\text{H}_2\text{O}$. Проведено синтез і рентгеноструктурний аналіз кристалічних фаз, виділених із розчинів систем $\text{A}^+ - \text{Y}_3^+ - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{A}^+ = \text{K}^+, \text{NH}_4^+$) і $\text{M}_2^+ - \text{Y}_3^+ - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}_2^+ = \text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$) за кислотності $Z = 0,80$. Синтезовано й охарактеризовано методами ІЧ-спектроскопії, СЕМ та РСА $\text{Na}_2(\text{NH}_4)_8[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ та $\text{K}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 13\text{H}_2\text{O}$, утворення яких відбувається в результаті гідролітичного перетворення аніонів $[\text{Y}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ на більш термодинамічно стабільний аніон $[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{10-}$. Досліджено взаємодії у водному розчині $\text{Cu}^{2+} - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ (Z = 1,17) - \text{H}_2\text{O}$ методами рН-потенціометричного титрування із наступним математичним моделюванням за програмою CLINP 2.1. В якості адекватної експерименту була обрана модель, до якої входили йонні пари $[\text{Cu}^{2+}, \text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{8-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{HW}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{7-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_3\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{5-}$. Визначено границі заміщень та фазової стабільності для твердих розчинів ортованадатів $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{VO}_4$ зі структурою циркону, $\text{Ln} = \text{Ce} - \text{Lu}$. Енергії змішування та критичні температури розпаду твердих розчинів $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{VO}_4$ зі структурою циркону розраховано з використанням кристалоенергетичної теорії ізоморфних заміщень. Наведено діаграму термодинамічної стабільності, яка дозволяє прогнозувати границі заміщень x за T розпаду або T розпаду за значенням x та залежності температур розпаду від атомних номерів Ln . Діаграма дозволяє оцінити області стабільності, нестабільності та метастабільності твердих розчинів $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{VO}_4$. Результати дослідження можуть бути використані при розробці нових люмінесцентних матеріалів на основі ScVO_4 , модифікованих РЗЕ, при виборі РЗЕ для матриці та активатора, при визначенні оптимальних пропорцій РЗЕ в матрицях $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{VO}_4$.

Реферат англійською:

The formation of Ho(III)-containing polyoxotungstates in acidified to different acidity $Z = \frac{\alpha(\text{H}^+)}{\alpha(\text{WO}_4^{2-})} = 0.80, 1.17, 1.29, \text{ and } 1.50$ solutions of the system $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{HNO}_3 - \text{Ho}(\text{NO}_3)_3 - \text{H}_2\text{O}$ was studied. The conditions for the synthesis of $\text{Na}_9[\text{Ho}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 23\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}_2\text{Ho}_2[\text{Ho}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 46\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ho}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]_3 \cdot 54\text{H}_2\text{O}$ were established. Synthesis and X-ray diffraction analysis of crystalline phases isolated from solutions of systems $\text{A}^+ - \text{Y}_3^+ - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{A}^+ = \text{K}^+, \text{NH}_4^+$) and $\text{M}_2^+ - \text{Y}_3^+ - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}_2^+ = \text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$) at acidity $Z = 0,80$ were performed. Synthesized and characterized by FTIR spectroscopy, SEM and single crystal X-ray analysis $\text{Na}_2(\text{NH}_4)_8[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ and $\text{K}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2] \cdot 13\text{H}_2\text{O}$, the formation of which occurs as a result of hydrolytic conversion of $[\text{Y}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ anion to a more thermodynamically stable anion $[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{10-}$. Interactions in an aqueous solution of $\text{Cu}^{2+} - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ (Z = 1,17) - \text{H}_2\text{O}$ were studied by pH-potentiometric titration methods followed by mathematical modeling according to the CLINP 2.1 program. As an adequate experiment, a model was selected, which included ion pairs $[\text{Cu}^{2+}, \text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{8-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{HW}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{7-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_3\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{5-}$. The mixing energies (interaction parameters) and critical decomposition temperatures of $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{VO}_4$ solid solutions with the zircon structure were calculated using the crystal-energy theory of isomorphous miscibility. Diagram of thermodynamic stability visualizing the substitution

limits (x) by the decomposition temperature or the decomposition temperature by the substitution limits, the dependencies of the decomposition temperatures on the REE atomic numbers is presented. The results of this study can be used in the development of new luminescent materials based on ScVO₄ modified with REE, in the selection of REE for matrix and activator, in defining optimal proportions of REE in Sc_{1-x}Ln_xVO₄ matrices.

Індекс УДК: 546;54-386, 546.2, 546.2, 54-386, 546.786+546.776+546.65+548.73+546.05

Коди тематичних рубрик: 31.17, 31.17.15.25, 31.17.15.31, 31.17.29.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Розанцев Георгій Михайлович

Науковий ступінь: д. х. н.

Наукове звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

IX. Бібліографічний опис

Mariichak O.Yu., Ignatyeva V.V., Baumer V.N., Rozantsev G.M., Radio S.V. Heteropoly decatungstolanthanidates(III) with Peacock-Weakley type anion: Synthesis and crystal structure of isostructural salts Na₉[Ln(W₅O₁₈)₂]·35H₂O (Ln=Gd, Er) // Journal of Chemical Crystallography. – 2020. – Vol. 50, No. 3. – P. 255–266. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10870-020-00845-2>

Ardanova, L.I., Get'man, E.I., Radio, S.V., Hill, I.M., Ignatov, A.V. Isomorphous Substitutions in Luminescent Materials Based on ScVO₄ // Key Engineering Materials. – 2020. – Vol. 865. – P. 37–42. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/kem.865.37>

Ardanova L., Chebyshev K., Ignatov A., Pasechnik L., Selikova N., Get'man E., Radio S. Fluorite-Like Neodymium Molybdates Doped with Lead // Key Engineering Materials. – 2020. – Vol. 865. – P. 49–53. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.865.49>

Марійчак О.Ю., Олексій Ю.А., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез, ІЧ-спектроскопічний аналіз і мікроморфологія поверхні Ho(III)-вмісних поліоксовольфраматів // Вісник Одеського національного університету. Хімія. – 2020. – Т. 25, № 3 (75). – С. 63–75. DOI: [http://dx.doi.org/10.18524/2304-0947.2020.3\(75\).211723](http://dx.doi.org/10.18524/2304-0947.2020.3(75).211723)

Mariichak, O.Y.; Kaabel, S.; Karpichev, Y.A.; Rozantsev, G.M.; Radio, S.V.; Pichon, C.; Bolvin, H.; Sutter, J.-P. Crystal Structure and Magnetic Properties of Peacock-Weakley Type Polyoxometalates Na₉[Ln(W₅O₁₈)₂] (Ln = Tm, Yb): Rare Example of Tm(III) SMM // Magnetochemistry. – 2020. – Vol. 6, No. 4. – P. 53. DOI: <https://doi.org/10.3390/magnetochemistry6040053>

Get'man E.I., Oleksii Yu.A., Radio S.V., Ardanova L.I. Determining the phase stability of luminescent materials based on the solid solutions of oxyorthosilicates (Lu_{1-x}Ln_x)[(SiO₄)_{0.5}O_{0.5}], where Ln = La–Yb // Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol. – 2020. – Vol. 15, No. 5. – P. 54–62. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-5-54-62>

Duvanov E., Radio S., Rozantsev G., Didenko N. Synthesis and Surface Micromorphology of Double Potassium-Cadmium Paratungstate K₂Cd₄[W₁₂O₄₀(OH)₂]·28H₂O. 2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), Sumy, Ukraine, 2020, pp. 01NSSA08-1-01NSSA08-4, doi:

10.1109/NAP51477.2020.9309555 (Scopus)

Ardanova L.I., Get'man E.I., Radio S.V., Hill I.M., Oleksii Y.A., Zubov E.E. Computational and Experimental Study of Gd-substituted Scandium Orthovanadate Systems. 2020 IEEE 10th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), Sumy, Ukraine, 2020, pp. 01NSSA09-1-01NSSA09-6, doi: 10.1109/NAP51477.2020.9309549 (Scopus)

Дюбанов В.В., Дуванова Е.С., Поліщук О.Р., Попова А.В., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Поліоксовольфраматни кобальту в підкислених розчинах і твердій фазі // Current chemical problems (CCP-2020): book of abstracts of the III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 25–27, 2020, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O.M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2020. – P. 49.

Mariichak O.Yu., Rozantsev G.M., Radio S.V. Crystalline salts with Peacock–Weakley type heteropoly anion $\text{Na}_9[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]\cdot n\text{H}_2\text{O}$ (Ln = lanthanide): Synthesis, crystal structure and properties // Current chemical problems (CCP-2020): book of abstracts of the III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 25–27, 2020, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University. – Vinnytsia, 2020. – P.54.

Олексій Ю.А., Радіо С. В., Гетьман Є.І. Оцінка стабільності твердих розчинів ортоарсенатів $\text{Sc}_{1-x}\text{Ln}_x\text{AsO}_4$ і $\text{Tb}_x\text{Ln}_{1-x}\text{AsO}_4$ // Current chemical problems (CCP-2020): book of abstracts of the III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 25–27, 2020, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O.M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2020. – P. 56.

Лекційний матеріал «Координаційна хімія» на платформі дистанційного навчання MOODLE / Сорочук Д.І., Щіпіна К.П., Дуванова Е.С., Розанцев Г.М. // Current chemical problems (CCP-2020): book of abstracts of the III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 25–27, 2020, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University. – Vinnytsia, 2020. – P. 155.

Линник Т.В., Дуванова Е.С., Попова А.В., Розанцев Г.М. Стан іонів Ванадію (V) у водно-ДМФА розчині // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (29 квітня 2020 р.). Матеріали конференції. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2020. – С. 148.

Стан іонів Ванадію (V) у водно-ДМФА розчині / Линник Т.В., Дуванова Е.С., Попова А.В., Розанцев Г.М. // Тези доповіді Всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи», 29 квітня 2020. – Житомир. – С. 148.

Марійчак О.Ю., Поповська О.Ю., Румянцева Ж.О., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез, ІЧ-спектроскопічний, термогравіметричний аналіз та мікроморфологія поверхні натрію гетерополідекавольфрамодиспрозіату (III) // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (29 квітня 2020 р.). Матеріали конференції. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2020. – С. 148–150.

Дуванова Е.С., Савчук Ю.В., Поліщук О.Р., Рисіч А.В., Лучко М.В., Печаліна Є.І., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Взаємодія катіонів Мангану з підкисленим до $Z=1,00$ розчином ортовольфрамату натрію // Проблеми та досягнення сучасної хімії: Збірник тез доповідей XXI Наукової молодіжної конференції (Одеса, 7-8 травня 2020 р.) / ред. Семенішин М. М. – Одеса: Бондаренко М.О., 2020. – С. 18.

Олексій Ю.А., Марійчак О.Ю., Румянцева Ж.О., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Аналіз стану ізополівольфрамат-аніонів у фізіологічному розчині Трисоль (Trisolium) // Збірка тез доповідей XXI Міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Сучасні проблеми хімії» (Київ, КНУ імені Тараса Шевченка, 20-22 травня 2020 р.). – Київ, 2020. – С. 35.

Дуванова Е.С., Печаліна Є.І., Поліщук О.Р., Рисіч А.В., Літвак Л.В., Попова А.В., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез змішаних паравольфраматів Б цинку з катіонами натрію та калію // Збірка тез доповідей XXI Міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Сучасні проблеми хімії» (Київ, КНУ імені Тараса

Шевченка, 20-22 травня 2020 р.). – Київ, 2020. – С. 83.

Mariichak O.Yu., Tsyba I.O., Oleksii Yu.A., Rozantsev G.M., Radio S.V. Tm(III)-containing heteropoly tungstate with Peacock–Weakley type anion: Synthesis of $\text{Na}_9[\text{Tm}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]\cdot n\text{H}_2\text{O}$ from aqueous and aqueous-organic media, crystal structure, and properties // Book of abstracts XXI International Conference for Students, PhD Students and Young Scientists «MODERN CHEMISTRY PROBLEMS» (Kyiv, Taras Shevchenko KNU, May 20–22, 2020). – Kyiv, 2020. – P. 108.

Get'man E.I., Oleksii Yu.A., Radio S.V., Ardanova L.I. Predicting the stability of orthoarsenates $\text{Lu}_{1-x}\text{Ln}_x\text{AsO}_4$, $\text{Ln} = \text{Sm}–\text{Yb}$, Sc , Y , and $\text{La}_{1-x}\text{Ln}_x\text{AsO}_4$, $\text{Ln} = \text{Ce}$, Pr , Nd solid solutions // The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO–2020) (26–29 August 2020, Lviv). – Kiev: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. – P. 146.

Get'man E., Ignatova L., Radio S. Prediction of substitution limits in luminescent, laser, and other materials on the base of crystal-chemical 3D model / Ist International Research and Practice Conference «Nanoobjects & Nanostructuring» (N&Np2020), September 20–23, 2020, Lviv, Ukraine: Book of Abstracts // Ivan Franko National University of Lviv; Shevchenko Scientific Society. – Lviv: Research and Publishing Center of the Shevchenko Scientific Society, 2020. – P. 21.

Bisikalo O.V., Kudryk O.V., Oleksii Y.A., Radio S.V. Intelligent information system for predicting the phase stability of solid solutions with zircon structure // Матеріали XV Міжнародної конференції "Контроль і управління в складних системах (KYCC-2020)" / MEASUREMENT AND CONTROL IN COMPLEX SYSTEMS (MCCS-2020), м. Вінниця, 8-10 жовтня 2020 р. <https://ir.lib.vntu.edu.ua/handle/123456789/30658>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Хаджинов Ілля Васильович

д. е. н., 08.00.02

Перелік осіб-виконавців

Баумер Вячеслав Миколайович

(к. х. н., 02.00.04)

Борисюк Каріна Юріївна

Гетьман Євген Іванович

(д.х.н., 02.00.01)

Дуванова Елла Сергіївна

(д.філософ, 102)

Марійчак Олександра Юріївна

Олексій Юлія Анатоліївна

Печаліна Євгенія Ігорівна

Поповська Олена Юріївна

Радіо Сергій Вікторович

(к. х. н., 02.00.01)

Розанцев Георгій Михайлович

(д. х. н., 02.00.01)

Циба Ілона Олександрівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

РАДІО Сергій Вікторович

Телефон

+38 (095) 397-43-17

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

